

Конформационная динамика ДНК с учетом взаимодействия с белками

Фатихова Фидалия Гайнетдиновна

Башкирский государственный университет

Закирьянов Фарит Кабирович, к.ф.-м.н.

fatihova_1997@mail.ru

Изучение динамики ДНК является одним из важных направлений в современной биофизике и биохимии. Это доказывается экспериментальными и теоретическими работами, выполненными в последние несколько десятков лет, прошедших после открытия структуры ДНК.

Молекула дезоксирибонуклеиновой кислоты (ДНК) представляет собой линейный вытянутый эластичный полимер, составленный из поворачивающихся нуклеотидов. Механическим аналогом такой системы является цепочка связанных маятников. Двойная спираль ДНК моделируется двумя линейными цепочками маятников (азотистые основания), связанных пружинными подвесками (сахарно-фосфатный остов – СФО). Динамика таких систем, и следовательно, динамика модели ДНК описывается уравнениями типа синус-Гордон, их модификациями и системами таких уравнений.

В нашей работе уравнение движения имеет вид модифицированного уравнения синус-Гордона:

$$\psi_{tt} - \psi_{xx} + [1 - k_r R(\xi, x)] \sin \psi = 0$$

где $\psi(x, t)$ – угол поворота основания вокруг СФО, k_r – коэффициент взаимодействия белка с ДНК, $R(\xi, x) = \theta[d^2 - (\xi - x)^2]$ – фактор сопряжения белка с ДНК, θ – функция Хевисайда.

Так как рассматриваемое уравнение является нелинейным, то нахождение его решений осуществлялось численно. Решения эти при $k_r = 0$ хорошо известны в литературе и имеют вид нелинейных уединённых волн – солитонов и кинков. При $k_r \neq 0$ эти решения выглядят более сложно:

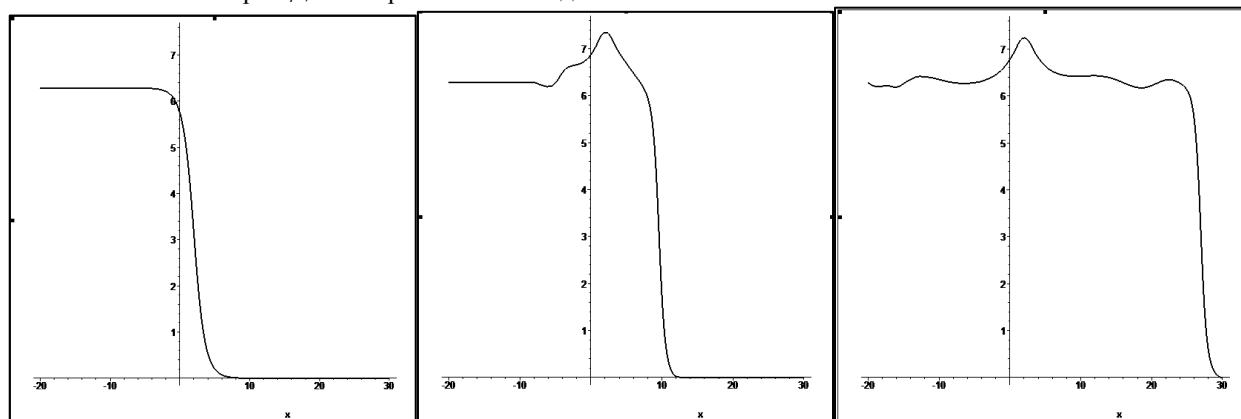


рис.1 Динамика движения кинка в ДНК в различные моменты времени

Таким образом, можно сделать вывод, что учёт взаимодействия ДНК с белком сохраняет качественный вид решения классического уравнения син-Гордона, но вносит небольшие возмущения в профиль решения.

Список публикаций:

[1] Derks, G and Gaeta, G (2011) A minimal model of DNA dynamics in interaction with RNA-Polymerase //Physica D: -2011 //Nonlinear Phenomena, 240 (22). pp. 1805-1817